

Li 挿入による Cu_3N の非金属-金属転移Nonmetal-metal transition in Li-inserted Cu_3N

中部大院工 ○丸矢 航平, 清水 航, 井野 龍一朗, 二宮 善彦, 佐藤 厚, 山田 直臣

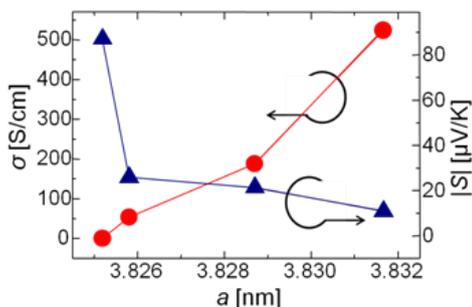
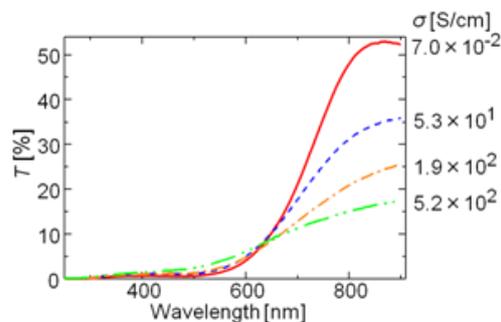
Chubu Univ. ○K. Maruya, K. Shimizu, R. Ino, Y. Ninomiya, A. Sato, N. Yamada

E-mail: n-yamada@isc.chubu.ac.jp

【背景】構造に空隙を有する物質は、その内部に異種元素を取り込むことがある。そのような構造をもつ物質として anti- ReO_3 型構造の Cu_3N がある。 Cu_3N の空隙に Li が挿入できることは知られている[1]。しかし Li を挿入した際の電気伝導性の変化について実験的に調べた報告はない。一方で、Li を挿入すると伝導電子が増加することが理論的に予測されている[2]。そこで我々は Cu_3N 薄膜に Li を挿入し、電気伝導性の変化について調べている。その結果、Li 挿入に伴って非金属-金属転移が起こることがわかった。本講演ではこれについて報告する。

【実験】スパッタリング法で Cu_3N 多結晶薄膜を作製した。成膜条件は $\text{N}_2/(\text{Ar}+\text{N}_2) = 40\%$ 、基板温度室温、全圧 2.0 Pa とした。成膜した薄膜を *n*-ブチルリチウムヘキサン溶液に浸漬し、60 °C に加熱した。作製した薄膜を X 線回折(XRD)、導電率測定、Seebeck 効果測定、透過率測定、Hall 効果測定により評価した。

【結果】XRD 測定により、浸漬時間が長くなるにつれ格子定数(*a*)が増大することがわかった。Fig. 1 に示す通り、*a* の拡大と共に導電率(σ)、Seebeck 係数の絶対値($|S|$)が変化した。これにより格子内に Li が挿入され、キャリアが増大していることがわかる。さらに、Fig. 2 を見ると、 σ の変化と共に可視光の高波長側の透過率(*T*)が低下している。これは、キャリア濃度の増加に伴う自由電子吸収によるものと解釈できる。Li の挿入により σ は 7.0×10^{-2} S/cm から 5.2×10^2 S/cm に達し、キャリア濃度は最大で $n_e = 6.52 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ になった。以上のことから Li が Cu_3N 内部に挿入され非金属-金属転移が起こっていると考えられる。なお、Li 挿入のメカニズムについては、当日に議論する。

Fig. 1 σ , $|S|$ の *a* 依存性Fig. 2 *T* の σ 依存性[1] Gulo *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **43**, 2032 (2004).[2] Hou, *Solid State Sci.* **10**, 1651 (2008).